スピン梯子系の対称性の破れについて

松井　卓 (九大・数理)

1　状態の Split 性

ここでは、各格子点でスピン $\frac{1}{2}$ の自由度を持ち、足の数が奇数のスピン梯子系では、なぜ相関関数の減少が緩やかであるかを考察する。方法は作用素環の最近の結果（I型因子環のシフト）を使う。以下では、ハミルトニアンの固有状態を求め性質を議論するのではなく、純粋状態の相関関数が split 性という条件を満たすと対称性の破れが自動的に起きることを示す。個々のハミルトニアン特殊性によらず、量子力学的状態のあるクラスについての性質の研究であるという点で以下の結果は普遍性がある。しかし、実際の実験解析で使われるハミルトニアンについては、何の情報もえられないという欠点があり、kinematical な議論であるも言えよう。スピン梯子系の研究は、実験、理論の両方で過去数年さかんに行われてきた。それらの成果については、(少し古いが) E.Dagotto と T.M.Rice のレヴュー [3] を見ていただくことにして、数学的定式化から説明する。

ここでは無限系を考察する。正の自然数 n に対して L_n を以下で定める。

$$L_n \quad = \quad \Big\{ \ (j,a) \ \in \mathbf{Z}^2 \ | \ j \in \mathbf{Z} \ a = 1,2,3....n \Big\}$$

自然数 n は、梯子の足の数である。簡単のため L_n の各格子点にはスピン $\frac{1}{2}$ の自由度がのっているとするが、以下の議論は並進不変性を保ちながら格子点ごとにあるスピン自由度の大きさを変えてもよい。(＝何番目の足に格子点があるかを示す a によってスピンの大きさを変えてもよい。) 格子点 $(j,a) \in L_n$ でのパウリスピン行列を $\sigma_\alpha^{(j,a)}$ ($\alpha = x,y,z$) であらわす。スピン作用素のなす代数 $\mathcal{A}$ を

$$\mathcal{A} = \bigotimes_{L_n} M_2(\mathbf{C})$$

で定める。($M_2(\mathbf{C})$ は、2行2列複素正方行列全体を表す。) また、τ_j は格子上の j シフトとする。つまり τ_j は、$\mathcal{A}$ のうえの自己同型で

$$\tau_j(\sigma_\alpha^{(k,a)}) = \sigma_\alpha^{(j+k,a)}$$

で定まる。さらに $\mathcal{A}$ の部分代数 $\mathcal{A}_R$ を非負の j ($j = 0,1,2,3...$) の格子点上の物理量のなす代数と定める。(言い換えると $\mathcal{A}_R$ は非負の j の $\sigma_\alpha^{(j,a)}$ で生成される部分代数) また $\mathcal{A}_L$ を負の j ($j = -1,-2,-3...$) の格子点上の物理量のなす代数とする。$\mathcal{A}_R$ ($\mathcal{A}_L$) は、右 (左) 半無限領域での観測量全体ですると $\mathcal{A} = \mathcal{A}_L \otimes \mathcal{A}_R$ である。

ここでは、状態と言うとベクトルではなくベクトルから定まる局所物理量の期待値のこととする。より正確にはφが、$\mathcal{A}$の状態であるとは、$\varphi(1)=1$と、任意の局所物理量Qについて$\varphi(Q^*Q)\geq 0$をみたし、$\mathcal{A}$から複素数への線形写像であることとする。$\mathcal{A}$の状態φの$\mathcal{A}_R$への制限をφ_R、$\mathcal{A}_L$への制限をφ_Lと書くことにする。一般に$\mathcal{A}$の状態φをある領域　$\Lambda\subset L_n$　に制限して考えるときφ_Λと書くことにする。

通常、スピン梯子系の研究では1次元系のハミルトニアンを何らかの意味で解き、基底状態を求め、スペクトルや2点相関関数の減衰、並進不変性の破れを研究するわけで、これに従い、主に状態としては純粋状態を考える。

あるハミルトニアンの基底状態φで2点相関関数の指数的減少すると仮定する。つまり物理量Q_1とQ_2について2点関数の収束

$$\lim_{k\to\infty}\varphi(Q_1\tau_k(Q_2))=\varphi(Q_1)\varphi(Q_2)$$

が早い。$\varphi_{(-\infty,0]\cup[k,\infty)}$、$\varphi_{(-\infty,0]}$と$\varphi_{[k,\infty)}$は、状態$\varphi$をそれぞれ$\{(j,a)\in L_n\,|\,j\in(-\infty,0]\cup[k,\infty)\}$ $\{(j,a)\in L_n\,|\,j\in(-\infty,0]\}$ $\{(j,a)\in L_n\,|\,j\in[k,\infty)\}$の領域に制限した状態とする。すると十分大きな距離kだけ離れ2つの異なる領域$(-\infty,0]$、$[k,\infty)$に限って状態φをみるとほぼ統計的な独立性があると解釈できる。これは、$\varphi_{(-\infty,0]\cup[k,\infty)}$は、$\varphi_{(-\infty,0]}\otimes\varphi_{[k,\infty)}$に近いということである。指数的減少する2点相関関数を持つ状態は積状態に近いという考え方を次のように一般化して考える。

定義 1.1 並進不変な状態φが、*split*であるとは、次が成立すること。

$$\lim_{k\to\infty}\sup_{\|Q\|\leq 1}\left|\sum_{i,j}\gamma_{ij}(\varphi(Q_j\tau_k(R_i))-\varphi(Q_j)\varphi(R_i))\right|=0 \tag{1.1}$$

ただし上の式でQは、任意の$\mathcal{A}$に属する局所物理量でノルム$\|Q\|$が1以下のものとする。任意の$\mathcal{A}$の元Qは、$\mathcal{A}_L$の元Q_jと$\mathcal{A}_R$の元R_i及び複素数γ_{ij}を用い

$$Q=\sum_{i,j}\gamma_{ij}Q_jR_i\quad \gamma_{ij}\in\mathbf{C}\quad Q_j\in\mathcal{A}_L\quad R_i\in\mathcal{A}_R.$$

の形でいつも表わされるので、この形でQで表わして*(1.1)*を考える。

このsplitという条件は、一見しただけでは、どれだけ一般的か、或いは、どれだけ特殊かは明らかではない。しかし2点相関関数が指数的減少する基底状態で数学的厳密に扱える例はほとんど全てsplit条件をみたす。例えば、梯子系ではないが、スピン1でハルデーン予想を肯定的にしたAffleck Kennedy Lieb Tasaki模型(AKLT模型)の基底状態はsplitである。ここでAKLT模型とは次のハミルトニアンで与えられる。

$$H=\sum_{j=-\infty}^{\infty}\left\{(S^{(j)}S^{(j+1)})+\frac{1}{3}(S^{(j)}S^{(j+1)})^2\right\}$$

ただし$S_\alpha^{(j)}$ $(\alpha=x,y,z)$はサイトjでのスピン1作用素とすると

$$(S^{(j)}S^{(j+1)})=S_x^{(j)}S_x^{(j+1)}+S_y^{(j)}S_y^{(j+1)}+S_z^{(j)}S_z^{(j+1)}$$

である。

一般に1次元短距離相互作用のハミルトニアンから定まるギッブス状態は、split 条件をみたす。

AKLT 模型の数学的性質を一般化して次の結果を得た。並進不変ハミルトニアンを考える。

$$H = \sum_{j=-\infty}^{\infty} h_j \quad \tau_j(h_0) = h_j \tag{1.2}$$

ただし h_j はサイト j と j + 1 の相互作用（最近接相互作用）とする。

命題 1.2 *(1.2)* で表わされるハミルトニアンの並進不変基底状態 φ を考える。ハミルトニアンについて次の2条件を仮定する。
(i)　有限体積でのハミルトニアンの基底状態の次元は体積によらずある数 k より小さい。ここで有限体積でのハミルトニアン $H_{[N,M]}$ は

$$H_{[N,M]} = \sum_{j=N}^{M-1} h_j$$

とする。
(ii) h_0 の最低固有値を $\inf spec\, h_0$ とおくと

$$\varphi(h_j) = \varphi(h_0) = \inf spec\, h_0 \ . \tag{1.3}$$

これらの仮定 *(i) (ii)* が成立するとき φ は *split* 条件をみたす。

命題1.2. で条件 (i) は、反強磁性系でたいがい成立する。条件 (ii) は、有限体積でのハミルトニアン $H_{[N,M]}$ の基底状態エネルギーが、ちょうど体積 $M-N$ に比例するという条件と等価である。実は命題 1.2. の仮定 (i) (ii) が成り立つとき基底状態は matrix product 状態（AKLT の valence bond state の一般化）で必ず表わされることが証明できる。

split 条件をみたす別の例として（ギャップのある）XXZ 模型をあげよう。XXZ 模型のハミルトニアン H_{XXZ} は

$$H_{XXZ} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left\{ \sigma_x^{(j)}\sigma_x^{(j+1)} + \sigma_y^{(j)}\sigma_y^{(j+1)} + \Delta\sigma_z^{(j)}\sigma_z^{(j+1)} \right\}$$

パラメータ Δ が十分に大きいときは基底状態は2つありどちらも split 条件をみたす。この場合、基底状態は2次元古典スピン系の平衡状態の1次元格子への射影として表され、もしハミルトニアンの古典イジングの項が十分大きいと1次元短距離古典スピン系の平衡状態と等価となり、split 性が成立する。スピン $\frac{1}{2}$ の XXZ 模型は可解模型であるが、split 条件は、今のところ、厳密には、十分に大きい Δ でしか証明できていない。しかし直感的には $\Delta > 1$ をみたす任意の Δ で split 条件が成立すると思われる。

一方、split 条件をみたさない基底状態の例は、（数学的厳密なレベルでは）あまり知られてない。XXZ 模型の場合 $\Delta = 0$ の XY 模型では基底状態は split 条件をみたさないことが証明できる。おそらく $-1 < \Delta \leq 1$ でも split 条件をみたさないと予想している。

予想 1.3 状態φは、ある並進不変なハミルトニアンの並進不変純粋基底状態とする。ハミルトニアンのスペクトルはギャップをもち、2点相関関数が指数的減少するならφは、*split* 条件をみたす。

以上の観点から、やや乱暴だが、反強磁性スピン梯子系の基底状態は、おそらくsplit条件をみたすであろうと予想される。そこで以下ではsplit条件をみたすスピン梯子系の純粋状態を考えることにする。

2 対称性の破れ

L_n上のスピン梯子系に戻る。梯子の足の数の偶奇で系の性質が異なるのはsplit条件と次のように関係する。各格子点にはスピン$\frac{1}{2}$の自由度がのっている場合を考える。物理量のなす代数$\mathcal{A}$の上には自然に（大局的）ゲージ群$SU(2)$の作用β_g（$g \in SU(2)$)が定まる。

定理 2.1 梯子の足の数が奇数のスピン梯子系を考える。もし純粋状態φが、並進不変で *split* 条件をみたせば、$SU(2)$ゲージ不変でない。つまり、ある$SU(2)$の元$g \in SU(2)$があり

$$\varphi \circ \beta_g \neq \beta_g$$

この定理より、足の数が奇数のとき、純粋状態φは
(i) 並進不変でない (ii) split条件をみたさない 、又は (iii) $SU(2)$ゲージ不変でない
のいずれかが成立する。定理2.1では状態が反強磁性系の基底状態であることは仮定していない。反強磁性系の基底状態では、量子論的な揺らぎが大きいため古典スピン系の高温状態に近い性質を示すと信じられている。特に$SU(2)$ゲージ不変性は破れないと思われているので (i) 並進不変性が破れ周期2の状態があらわれるか、(ii) のsplit条件の破れる、のいずれかであると思われる。予想1.3が正しければ、(ii) のsplit条件の破れる場合は、スペクトルギャップは閉じ2点相関関数は緩やかに減衰することになり実験および厳密対角化、密度行列繰り込み群などの結果と一致する。

定理2.1が成立する理由は、一般にsplit条件をみたす純粋状態は次の意味でMatrix Product状態であるためである。スピン梯子系を離れ、一般の1次元スピン系を考える。$\mathcal{A}$を、1サイトの自由度が、d行d列の正方行列$M_d(\mathbf{C})$の1次元スピン系の観測可能量なす代数とする。

$$\mathcal{A} = \bigotimes_{\mathbf{Z}} M_d(\mathbf{C})$$

また、Gを連結、単連結半単純コンパクトリー群とし、Gのd次元ユニタリー表現π_dがd次元ベクトル空間V_d上にあるとする。さらに、このV_dの表現からGの大局的ゲージ変換が$\mathcal{A}$が定まるが、これを$SU(2)$の時と同じくβ_gと書く。

定理 2.2 $\mathcal{A}$の純粋状態φが、並進不変で *split* 条件をみたすとする。

このとき、あるヒルベルト空間$\mathcal{K}$、$\mathcal{K}$から$V_d \otimes \mathcal{K}$への線形作用素A、及び$\mathcal{K}$上の密度行列ρが存在し以下をみたす。

$$A^* A = 1_{\mathcal{K}}$$

全ての $\mathcal{K}$ 上の作用素 Q について

$$tr(\rho A^*(1_{V_d} \otimes Q)A) = tr(\rho Q)$$

ここで $1_{\mathcal{K}}$ と 1_{V_d} は $\mathcal{K}$ と V_d の恒等作用素で Q は任意の $\mathcal{K}$ の作用素。$M_d(\mathbf{C})$ の行列 R に対して E_R を次式で定める。

$$E_R(Q) = A^*(R \otimes Q)A$$

この記号を使うと、φ は、次式で与えられる。

$$\varphi(1_{V_d} \otimes R_1 \otimes R_2 ... R_m \otimes 1_{V_d}) = tr(\rho E_{R_1} \circ E_{R_2} \circ ... E_{R_m}(1_{\mathcal{K}})) \tag{2.1}$$

もし状態 φ が、ゲージ不変なら *(*$\varphi \circ \beta_g = \varphi$ が、全ての g で成立するなら*)* $\mathcal{K}$ 上に G のユニタリー表現 $\pi_{\mathcal{K}}$ があり、作用素 A は、以下の意味で、G のユニタリー表現の *intertwiner* である。

$$\pi_d(g) \otimes \pi_{\mathcal{K}}(g)A = A\pi_{\mathcal{K}}(g) \tag{2.2}$$

この定理2.2の最後の部分をスピン梯子系に適用すると定理2.1を得る。また、足の数 n が偶数のときは次が成立する。

系 2.3 梯子の足の数が偶数のスピン梯子系を考える。もし純粋状態 φ が、並進不変で *split* 条件をみたし $SU(2)$ ゲージ不変とする。このとき定理 *2.2* のユニタリー表現 $\pi_{\mathcal{K}}$ は、半奇数スピンの表現のみを含むか、または整数スピンの表現のみを含む。

$\mathcal{K}$ のベクトルは、ハルデーン系の edge 状態に対応するが、一般には、半奇数スピンと整数スピンの両方がありうる。

定理2.2は逆も成り立つ。すなわち (2.2) で表わされる純粋状態は split である。さらに定理2.2で $\mathcal{K}$ が有限次元となるときが [1] で考えられた valence bond solid state である。M.Fannes,B.Nachtergaele,R.Werner は、Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の valence bond solid state を拡張し finitely correlated state と名付け体系的に研究している。([4] と [5] を参照) 彼等が、で purely generated finitely correlated state と呼んでいる状態は定理2.2で $\mathcal{K}$ が有限次元となる場合に他ならない。purely generated finitely correlated state は、matrix product state と同じもので、密度行列繰り込み群で得られる固定点である。(これは、[7] で指摘されている。) 従って、密度行列繰り込み群での infinite system method は、定理2.2の作用素 A を有限次元行列近似を求めるためのアルゴリズムと言える。系2.3が意味するのは、密度行列繰り込み群では $\mathcal{K}$ の有限次元近似としては半奇数スピンの表現のみ、または整数スピンの表現だけをとる必要があることであり、経験則と合っている。

split 性を持つ純粋状態の2点相関関数の減衰のオーダーは定理2.2で定義した $E_{1_{V_d}}$ のスペクトルで決まる。定義より

$$E_{1_{V_d}}(1_{\mathcal{K}}) = 1_{\mathcal{K}}$$

なので1は $E_{1_{V_d}}$ の固有値である。状態 φ が純粋であるときは固有値1の重複度は1であり、$E_{1_{V_d}}$ のスペクトルの絶対値は1以下であることが、一般的に言える。2点相関関数が

指数的に減少するための必要十分条件は固有値1以外のスペクトルは、絶対値が真に1より小さいことである。しかしこの条件を満たさない（2点相関関数が指数的に減少しない）split 性を持つ状態を長距離相互作用を持つ系の基底状態として構成できる。

ここで述べた結果の証明は、[6] にある。split 性 などの研究は、まだ十分には進んでいない。実際、split 性の概念は公理的場の量子論でしばｈしば使われているが格子模型でのsplit 性の研究は、論文 [6] が初めてであると自負している。一方で、予想 1.3 などまだ分からないことが多いが、split 性の研究はハルデーン予想やスピン梯子系の理解に役立つ考えている。

参考文献

[1] Affleck,I. , Kennedy,T. , Lieb,E.H. , Tasaki,H. *Valence Bond Ground States in Isotropic Quantum Antiferromagnets* Commun. Math. Phys. **115**,477-528 (1988).

[2] Bratteli,O.,Jorgensen,P. *Endomorphisms of $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, II: Finitely Correlated States on O_N* J.Funct. Anal. **145** 323-373,(1997).

[3] Dagotto,E. , Rice,T.M. *Surprise on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials* Science **271**, 618-623.(1996).

[4] Fannes,M. , Nachtergaele,B. , Werner,R. *Finitely Correlated States on Quantum Spin Chains* , Commun.Math.Phys. **144**,443-490 (1992).

[5] Fannes,M. , Nachtergaele,B. , Werner,R. *Finitely correlated pure states* J.Funct. Anal. **120**, 511-534 (1994).

[6] Matsui,T. *Symmetry of the Spin Ladder* preprint

[7] Rommer,S. , Ostlund,S. *A class of ansatz wave functions for 1D spin systems and their relation to DMRG* archived in cond-mat/9606213.